



TITLE:

2000年度基礎物理学研究所研究会 「モンテカルロ法の新展開2」

AUTHOR(S):

CITATION:

2000年度基礎物理学研究所研究会「モンテカルロ法の新展開2」. 物性研究 2001, 76(6): 808-810

ISSUE DATE:

2001-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/97071>

RIGHT:

研究会報告

2000 年度 基礎物理学研究所研究会

「モンテカルロ法の新展開 2」

2000 年 10 月 30 日 ~ 11 月 1 日

(於：京都大学基礎物理学研究所 研究棟 2 階 K206 会議室)

(2001 年 7 月 5 日受理)

モンテカルロ法による数値的研究は計算物理や計算科学の分野の発展に大きな役割を果たしている。本研究会では、特に最近の動的モンテカルロ法及びその計算結果の解析法の技術的な進展を踏まえて、該当する様々な分野の研究者に発表して頂き、今後の発展の方向を議論した。主なトピックスは、次の 3 点であった。

1. シミュレーション結果の自動解析の研究

位相空間における分布の形やその動的な変化をシミュレーションデータから記述・解析することは簡単ではない。モンテカルロ法の発展等により、比較的容易にシミュレーションをすることが可能となり、「解析」方法も重要になってくる。研究会では、主成分分析や多次元尺度法等の多変量解析の手法の開発・応用やシミュレーションデータからの近似的な緩和モードの計算など解説があった。

2. 新しいモンテカルロ手法の研究とその応用

マルチカノニカル法、Simulated Tempering 法、交換モンテカルロ法など拡張アンサンブル法と呼ばれる一連の方法群は、緩和の促進、自由エネルギーの計算、「珍しい」event の解析などに威力を発揮することが確かめられ、様々な系に応用されている。研究会では、それらの方法の物理系への応用例の報告とともに、多変数版や合体版等の拡張アンサンブルの改良について議論が行われた。また、フラットヒストグラム法に代表されるような新しいモンテカルロ法についての試みも紹介された。

3. モンテカルロ法のダイナミカルな面の改良

拡張アンサンブル法は、ダイナミクスには手を触れずに効率を改善する試みである。問題によってはダイナミクスに改良を加えることで、より一層効率的な計算が可能になると思われる。典型的な例としては、分子動力学法とのハイブリッド型のアルゴリズム、クラスターモンテカルロなどがある。特に後者は、最近ループアルゴリズムと呼ばれる量子系への拡張に成功しており、大きく発展している。関連して、量子系のモンテカルロ法は負符号問題のために困難が多いが、この方向のアプローチの現状と最近の試みについて議論した。

世話人 伊庭 幸人 (統数研), 菊池 誠 (阪大理)
高野 宏 (慶大理工), 福島 孝治 (東大物性研)

研究会プログラム

10月30日(月)

解析部門

- 13:40-14:40 北尾 彰朗(京大理)*
JAM モデルを使って生体高分子のゆらぎを探る
- 14:40-15:10 萩田 克美(慶應大理工)
濃厚高分子溶液の MC における方法論の検討
- 休憩 15:10-15:40
- 15:40-16:10 伊庭幸人(統数研) 福島孝治(東大物性研)
感受率行列の固有状態 - メモリで泣かずに済む方法
- 16:10-17:10 田口 善弘*(中大 理工) 大野克嗣(イリノイ大 物理、慶応大数理)
効率のよい多次元尺度構成法とその応用

10月31日(火)

- 9:30-10:30 湯川 哲之*(総研大)
モンテカルロ法による時空の量子化
- 拡張アンサンブル法の応用と発展

- 10:50-11:20 菊地 誠(阪大サイバー)
境界を侵犯する 50 の方法
- 11:20-12:20 肥後 順一*(生物分子工学研)
水中のペプチドのエネルギー地形
- 13:30-14:00 礪部 雅晴(金沢大理)
マルチカノニカル分子動力学法を使ったモデル Protein-G 系の研究
- 14:00-14:30 光武 亜代理(分子研)
新拡張アンサンブル法によるタンパク質系のモンテカルロシミュレーション
- 14:30-15:00 千見寺 浄慈(阪大理) 菊地 誠(阪大サイバー)
3変数でマルチカノニカル-格子タンパク質模型への応用-
- 15:20-15:50 羽田野 直道(青山学院大理工)
3次元±J模型のマルチカノニカル・モンテカルロ計算
- 15:50-16:10 板倉 充洋(日本原子力研究所)
MCRG を使ったランダム磁場イジングモデルのRSB 相の検出
- 16:10-16:40 宗像豊哲(京大情報)
疑似除冷法と温度制御
- 16:40-17:10 伊庭 幸人(統数研)
拡張アンサンブル法の可能性

11月1日(水)

- 9:20-10:20 岡部 豊*(都立大理)
新しいモンテカルロ法の試みのあれこれ

クラスターモンテカルロとその発展

- 10:20-10:50 富田 裕介 (都立大理)
確率変動クラスターアルゴリズムの 3D q-state Potts モデルへの適用
- 11:00-12:00 川島 直輝* (都立大理)
ループ・クラスターアルゴリズムの最近の進展
- 12:00-12:30 原田 健自 (京大情報)
異方性を持つハイゼンベルグモデルのモンテカルロ法

量子系のモンテカルロ法

- 13:30-13:40 伊庭 幸人 (統数研)
量子系への展望
- 13:40-14:40 今田 正俊* (東大物性研)
経路積分くりこみ群法
- 14:40-15:40 宮下 精二* (東大工)
量子ダイナミックス (直接シミュレーション)
- 15:50-16:20 坂本 陽 (東京大工)
ファインマン・ダイアグラム量子モンテカルロ法による
フレーリッヒ・ポーラロンの研究
- 16:20-16:50 坂井 徹 (姫路工業大理)
ランダム初期ベクトルサンプリングを用いたランチョス法による
強相関電子系の擬ギャップの研究
- 16:50-17:10 福島 孝治 (東大物性研)
まとめ

*は招待講演者